相分離における強相関状態のスケーリング関数の研究(II理論I,相転移における秩序形成過程の動力学,科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

古川, 浩

相分離における強相関状態のスケーリング関数の研究

山口大学教育学部　古川　浩

二元合金等の相分離のダイナミックスは初期、中期、及び後期過程に大別出来る。何れの場合もその性格は体系の構造関数$S(k,t)$によってよく表される。特に後期過程においては構造関数（あるいは散乱関数は次の三つの特徴的な振舞いをしめす：

1) $S(k,t) = [R(t)]^d F(kR(t))$
2) $R(t) \propto t^a$
3) $F(x) \propto x^2$ for $x \leq 1$, $\propto x^{-(d+1)}$ for $x \geq 1$

dは空間次元、tは時間及びkは波数を表す。1)はスケイリングの仮設で後期過程ではただ一個の長さのスケール　R　（クラスターの大きさ）しか存在しない事を表す。2)は運動方程式が1)とconsistentであるために必要な条件である。3)の始めのものは物質の保存則を表し基礎方程式が広い意味で拡散方程式である事による。3)の第二のものはクラスターの界面が明確に形成される事を表し、局所的に相分離が完結していることを表す。 上の三つの性質は密接に関連しており、それぞれを切り放して独立に論ずる事は出来ない。これらを合わせて相分離の後期過程の特徴とすべきであろう[1)-3)]。最近の合金の実験[4)-6)]は正に1)-3) の検証を目的としたものであった、と言える。動的指数　a　は個々の物質や相分離の状態に依存しており、一般に複雑である。動的指数を決めるものはクラスターのmobility及び熱力学的駆動力である。mobility には三種類あり、駆動力にも三種類ある。一般に$a=1/(d+2+\varsigma-h)$ と与えられる[7)]。ここでςはmobilityの指数を表し、hは熱力学的駆動力の指数を表す。クラスターの界面上の原子が関与するsurface mobility では$\varsigma=1$，全体の原子が関与するbulk mobility では$\varsigma=0$,液体におけるクラスター自身の移動によるcluster mobility (Stokes)　では$\varsigma=-2$ となる。また、駆動力がthermal force の場合$h=0$, surface tension の場合$h=d-1$となる。そのほか場合によっては$h=-\infty$のこともある。その場合成長則は$\log t$　に比例する。普通、実際に観測されるのは最大の動的指数だと考えられているが、それはかならずしも正しくない。複数のメカニズムが競合して起こる場合には動的指数にクロスオーバーの現象が現れたり又は動的指数そのものが変わったりする。オーダーパラメターが保存しない系では$a=1/(d+\varsigma-h)$と与えられる。

スケイリング関数$F(x)$の$x^{-(d+1)}$ 依存性もある波数領域では満たされない事もある。即ちvolume fraction が大きな系ではクラスターはパーコレートしてしまい、滑らかな界面を持つとは考えにくくなる。その場合全ての方向が同等になり定性的には短距離の相関関数が距離のｄ乗（一方向の相関関数のｄ乗）に比例すると見なされ、構造関数のtailがx^{-2d} となるとかんがえられる[3)]。

さてF(x)のx^2の項はクラスターの拡散運動が原因だと述べたがこれまでこれに対して疑問が持たれた事はほとんどなっかた。そもそもクラスターの拡散とはクラスターが自由なBrownian粒子である事を前提とする。しかし大きいvolume fractionにたいしてはそのような事は考えにくい。相分離ではクラスターが次々に即ちカスケード的に合体して大きくなる[8]。その時クラスターが自由に動き回る事が出来れば構造関数にx^2の項が現れる。しかしクラスターが自由に動き回れないとなると事情は全くちがたものになる。

この問題を直接考えるかわりに次の簡単なモデルを考えよる[9]。始めd次元空間の立方体を考えよう。この立方体を一度の操作によって2^d個このセルに分割する。更に各セルはそれぞれ2^d個のセルに分割される。この様にしてnスッテプ後に2^{nd}個のセルが出来る。この時各セルの位置は固定されているものとする。図１に２次元における場合が示されている。ここでQは分割のランダムさを表すパラメーターである。Q=0のとき分割は等しい大きさのセルを生み出す。ここでのモデルはたとえば流体乱流における渦のカスケード的分割とよくにており、相分離におけるクラスターのカスケード的な成長の逆のプロセスと見なす事が出来る。逆カスケードプロセスを相分離に当てはめる妥当性はかならずしも明らかではない。しかし例えばクラスターサイズがカスケード過程特有の対数正規分布に従えば妥当性は確認される（図２、但し、この方法は小数成分系では使えない）。このモデルにおけるセルの重心のパワースペクトルを調べた。各セルのサイズは変えずにその位置をランダムにした場合パワースペクトルはローレンチアン的（図３）となる。このことが相分離における構造関数のx^2依存性と密接に結び付いている筈である。図４にモデルの１、２次元の計算例を示す。分割のランダムさが余り強く無ければスペクトルはk^{-d}を示す事が分かる。この結果は次の様な簡単な定性的な議論によって理解出来る。スペクトルは$kL/2\pi \approx 1$

図1

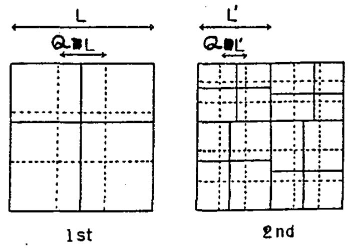
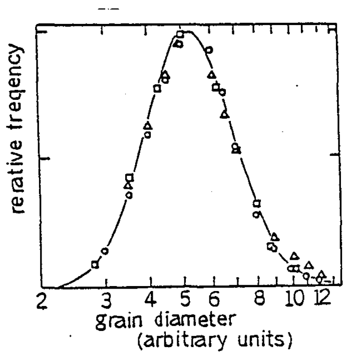


図2



P. Feltham
Acta. Metall
5(1957)
197
に83

図3

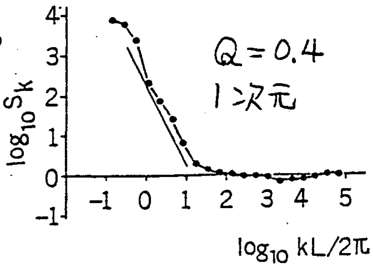


図4a

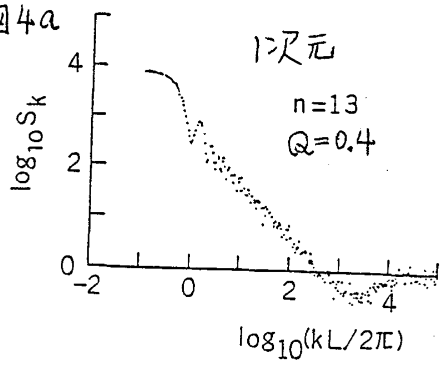
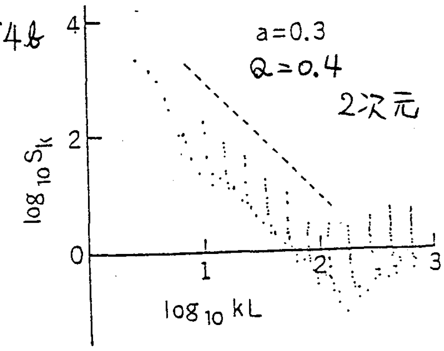


図4b



でN（セルの総数）に等しく、$kL/2\pi \approx N^{1/d}$ で1（一個の粒子の構造関数）に等しく、更にモデルの自己相似性からスペクトルはベキ乗則に従う。その結果スペクトルはk^{-d}となる。小さい波数の領域も含めればパワースペクトルとしてはローレンチアンの中のk^2をk^dで置き変えたものとなるだろう。以上の結果を相分離に当てはめればクラスターの干渉関数（相関関数から常数項を差し引いたもので与えられる[10)-12)]）及び構造関数は小さい波数のところで$1-1/(x^d+1) \approx x^d$依存性を持つと予想される。実は構造関数のx^3依存性（d=3）は既にFratzlら[13)]によって実験的に指摘されていた。彼らの結果の一部を図5に示す。彼らの結果はここでの予想とconsistentである。即ち一般にdeep quench の場合x^3依存性が現れshallow quenchではx^2依存性になる。これはdeep quenchではクラスターが自由に動き回れない事に因ると理解されよう。筆者自身deep quenchにたいする構造関数として以前$F(x) \propto x^2/(3+x^8)$ を考えたとき[14)]xの小さい所で実験と微妙に食い違う事に苦労した覚えがある。むしろ$F(x) \propto x^3/(2+x^9)$が適当と考えられる。図6に橋本[15)]らによる高分子の散乱実験のデータを示した。このデータにもk^3依存性が認められる。以上は保存系における場合であったが非保存系ではスペクトルはk^{-d}依存性をそのまま持つ可能性がある。図7は池田[16)]による1次元物質の散乱実験のデータであるがこれは非保存系に相当しk^{-1}スペクトルを示している。この場合、半値巾がドメインのおよその大きさの逆数を表すという常識は当てはまらない。この実験の理論的解析としては川崎等[17)]によるものがあるが、定性的にはここで考えたメカニズムが働いていると考えられる。

H_1 はクラスターの干渉関数

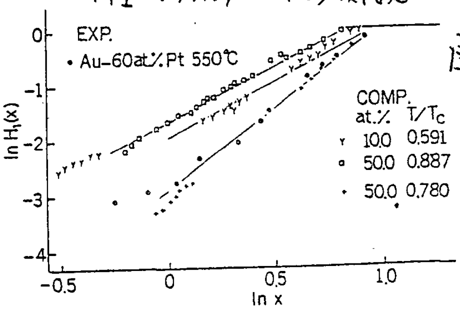


図5

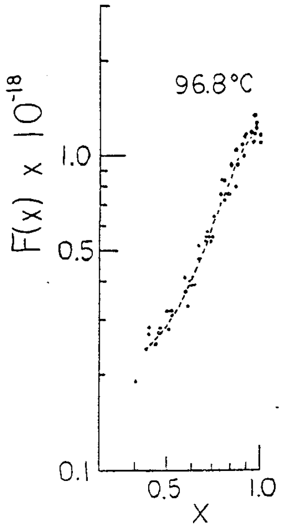


図6 高分子の散乱実験

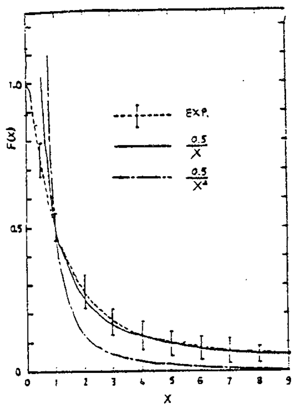


図7 1次元物質

相分離におけるスケーリング仮設はよく臨界現象におけるスケーリング仮設と対比される。しかし後者がグローバルであるのに対して前者はローカルである。ここで述べたメカニズムは相分離のローカル性に更にグローバルな観点を付け加える事になる。しかしそれは臨界現象的なグローバルさではなく乱流的グローバルさ即ちカスケードが主体となったグローバルさである。これらの観点は又1／fノイズのメカニズムと共通する（実際1／kスペクトルは1／fスペクトルである）ところがありこれら三者に共通する一般法則が

存在する事は十分予想される。

最後にここでみたような強相関状態における相分離のダイナミックスへの影響についてのべよう。互いに遠く離れた所にあるクラスターの成長が独立である場合、クラスターのサイズ分布は正規分布となる。しかしカスケード的な成長ではサイズ分布は対数正規分布となる。この事はクラスターサイズの対数が自由独立変数となることを意味する。従ってクラスターの成長が複数のメカニズムの競合に因って起こる場合、平均的振舞いは代数平均ではなく幾何平均によって与えられる。この結果動的指数はそれぞれのメカニズムの単純な平均で与えられる事になり、動的指数のずれを生み出す[18]。このような現象は実際に観測されている[19]。

参考文献

1) H. Furukawa, Prog. Theor. Phys. 59 (1978), 1072
2) H. Furukawa, Phys. Rev. Lett. 43 (1979), 136
3) H. Furukawa, Phys. Rev. A23 (1981), 1535
4) S. Katano and M. Iizumi, Phys. Rev. Lett. 52 (1984), 835
5) S. Komura, K. Osamura, H. Fujii and T. Takeda, Phys. Rev. B31 (1985), 1278
6) M. Furusaka, Y. Ishikawa and M. Mera, Phys. Rev. Lett. 52 (1984), 1321
7) H. Furukawa, Phys. Rev. A29 (1984), 2160
8) K. Binder and D. Stauffer, Phys. Rev. Lett. 33 (1974), 1006
9) H. Furukawa, Phys. Rev. B (Rapid communication, １９８６年 １月号), and preprint.
10) P.A. Rikvold and J.D. Gunton, Phys. Rev. Lett. 51 (1982), 286
11) T. Ohta, Ann. Phys. 158 (1984),31
12) H . Tomita, Prog. Theor. Phys. 71 (1984), 1405
13) P. Fratzl, J.L. Lebowitz, J. Marro and M.H. Kalos, Acta. Metall 31(1983), 1849
14) H. Furukawa, Physica 123A (1984), 497
15) T. Hashimoto, private communication
16) H. Ikeda, private communication
17) K. Kawasaki, see proceedings of this meeting
18) H. Furukawa, Prog. Theor. Phys. 73 (1985), 586, and Ref. 7)
19) P.S. Sahni, D. J. Srolovitz, G.S. Grest, M.P. Anderson and S.A. Safran, Phys. Rev. B28 (1983), 2705
A. Sadiq and K. Binder, Phys. Rev. Lett. 51 (1983), 674
Y. Ohyama, S. Kinoshita, M. Takahashi and T. Nose, Rept. Prog. Polym. Phys. Japan, 27 (1984), 503